



TITLE:

超伝導の強結合理論による擬ギャップ現象の理論(基研研究会「強結合超伝導-Pseudogapを中心として」,研究会報告)

AUTHOR(S):

柳瀬, 陽一; 山田, 耕作

CITATION:

柳瀬, 陽一 ...[et al]. 超伝導の強結合理論による擬ギャップ現象の理論(基研研究会「強結合超伝導-Pseudogapを中心として」,研究会報告). 物性研究 1999, 72(4): 487-499

ISSUE DATE:

1999-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96655>

RIGHT:

超伝導の強結合理論による擬ギャップ現象の理論¹

京都大学大学院 理学研究科 柳瀬 陽一², 山田 耕作

1 はじめに

高温超伝導体における擬ギャップ現象とは、超伝導転移点より高温で、いかなる長距離秩序も存在しないにもかかわらず、一粒子スペクトルにギャップ的な振舞いが見える現象である。この現象は高温超伝導体のアンダードープ領域では非常に広い範囲で見られており、早い段階で NMR の実験により磁気励起にギャップ的な振るまいが見られたことから高温超伝導体の正常状態の特徴として注目されてきた [1]。

この現象に対して理論の立場からは、スピン電荷分離の考え方にもとづく RVB 理論 [2] や反強磁性相関からのアプローチによる説明 [3] が試みられてきたが、近年、角度分解光電子分光 [4] やトンネルスペクトル [5] などの実験により、超伝導との連続性が示唆されたことを踏まえて、我々はこの現象を強結合超伝導の前駆現象と捉えて計算を行なうことで、このような現象が起こるメカニズムを明らかにし、相図の連続性や超伝導状態との連続性からも自然な理解が可能であることを示した。

超伝導の強結合理論とは通常の BCS 的な弱結合の超伝導と異なり、超伝導転移より前に強い引力により 2 粒子の結合状態ができ、それが低温で凝縮し、コヒーレントになることで超伝導転移が起こるというシナリオである。高温超伝導体に対してもランデリアらによりこのようなシナリオが提唱されてきた [6]。我々のシナリオはこのような単純な見方とは異なり、強結合超伝導に必然的にともなう強い揺らぎによって引き起こされる現象として擬ギャップ現象をとらえたものである。一般に強相関電子系では相互作用による繰り込みによりバンド幅が有効的に小さくなっており、それに比べて引力が大きくなることは十分にあり得ると思われ、強相関電子系における超伝導の一般的な性質の一つとしても重要である。

以下、第 2 章で超伝導の強結合理論にもとづいて我々が用いた理論的な枠組を説明し、第 3 章で、その枠組に基づいて、T-matrix 近似、及び self-consistent T-matrix 近似に対応する数値計算の結果を示す。第 4 章で、得られた結果に対するまとめといくつかの議論を行なう。

2 理論的枠組

一般に超伝導の強結合理論としては ノジエールとシュミットリンク に代表されるように BCS 超伝導と Bose 凝縮のクロスオーバーとして、主に低密度の電子ガスに対して研究が行なわれて

¹ 本稿の内容の主要な部分は現在 J. Phys. Soc. Jpn に投稿中である

² E-mail: yanase@ton.scphys.kyoto-u.ac.jp

きた [7]。これらの理論は熱力学的ポテンシャルに対する超伝導揺らぎからの第一図のダイアグラムに対応する寄与を計算して、化学ポテンシャルをセルフコンシステントに決めることにより、BCS 超伝導から Bose 凝縮までをクロスオーバーとして連続的に記述できるものである。

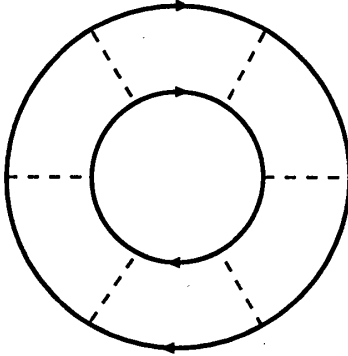


図 1:

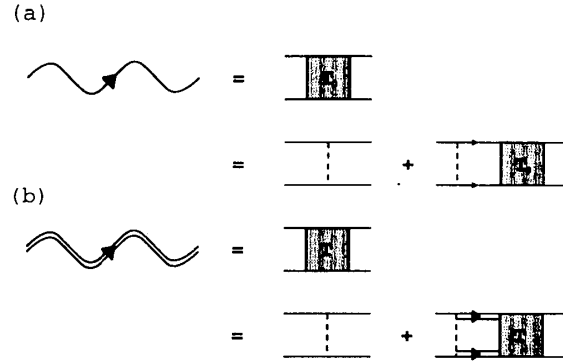


図 2: (a) 裸の T-matrix (b) 繰り込まれた T-matrix

しかし、これらの理論は低密度極限で正当化される理論であり、高温超伝導体のように格子上ハーフフィールド近傍で超伝導が起こる場合にはむしろ高密度としてとらえるべきであり、その擬ギャップ現象を考えるためには熱揺らぎにより有限エネルギーを持つ 2 粒子の結合状態ができることが元の電子状態に与える影響などを考えねばならず、ノジエール-シュミットリンクを越えた取り扱いが必要になる。実際に我々が現実的な要素を採り入れた計算を行なった結果、ノジエール-シュミットリンクで示されているような化学ポテンシャルのシフトはあまり重要ではなく、以下に示すように、強い超伝導揺らぎによる resonance の効果がむしろ支配的であることがわかる。

本研究においては、高温超伝導体で実際に起こっている擬ギャップ現象を考えるために *d*-波超伝導、格子上ハーフフィールド近傍、強い 2 次元性、粒子-ホール非対称性などの現実的な状況のもとでの強結合超伝導の前駆現象を考える。最終的にこれらの現実的な要素のそれぞれの重要性が示される。強結合超伝導の立場からの電子状態の計算は既に幾つかあるが [8]、これらの状況を何らかの形で無視しており、本質的に異なる結果を与えることになる。

まず、以下のように *d*-波の引力を導入した 2 次元正方格子上のモデルを考える。

$$H = \sum_{\mathbf{k},s} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},s}^{\dagger} c_{\mathbf{k},s} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2,\mathbf{k}'-\mathbf{q}/2} c_{\mathbf{k}',\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{q}-\mathbf{k}',\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{\mathbf{q}-\mathbf{k},\downarrow} \quad (1)$$

ここで、 $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ は次最近接ホッピングまで考慮して現実的なフェルミ面を再現するようにパラメータを選んだ分散関係である。

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu. \quad (2)$$

以下では、 $t = 0.5\text{eV}$ 、 $t' = 0.45t$ として、ホールドーピング $\delta = 0.1$ に対応するフィリングを考える。 $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ は *d*-波の引力であり、以下のように書ける。

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = g\varphi_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}'}, \quad (3)$$

$$\varphi_{\mathbf{k}} = \cos k_x - \cos k_y, \quad (4)$$

ここで、 $\varphi_{\mathbf{k}}$ は $d_{x^2-y^2}$ -波の形状因子であり、 $g < 0$ である。本来、超伝導の引力の起源は反強磁性的なスピン揺らぎであると考えられ、それは、電子状態に様々な影響をもたらすが、[9] $d_{x^2-y^2}$ -波超伝導の前駆現象という意味ではこのように簡単な引力の形から出発しても本質は失われないと考えられる。

まず、強結合超伝導に特有な強い超伝導揺らぎを考えるために、また、実際の（揺らぎにより抑制された）超伝導転移点近傍での電子状態を考えるために、その領域で支配的な散乱過程である、T-matrix を考える。それは、第2図のような particle-particle チャンネルの梯子状のダイアグラムである。これは、 $d_{x^2-y^2}$ -波の形状因子で分解され、一般に次の表式で表される。

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{q} - \mathbf{k} : \mathbf{k}', \mathbf{q} - \mathbf{k}' : i\Omega_n) &= \varphi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} t(\mathbf{q}, i\Omega_n) \varphi_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}/2} \\ t(\mathbf{q}, i\Omega_n)^{-1} &= g^{-1} + \chi_0(\mathbf{q}, i\Omega_n), \\ \chi_0(\mathbf{q}, i\Omega_n) &= T \sum_{\mathbf{k}', \omega_m} G(\mathbf{k}', i\omega_m) G(\mathbf{q} - \mathbf{k}', i\Omega_n - i\omega_m) \varphi_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}/2}^2, \end{aligned} \quad (5)$$

この T-matrix は超伝導揺らぎのプロパゲーターに対応するもので、これが $\mathbf{q} = \Omega = 0$ で発散する時に超伝導転移が起きるとするのが有名なサウレス条件である。そのため、超伝導転移点近傍では $\mathbf{q} = \Omega = 0$ の近傍からの寄与が支配的であり、以下のように Time-Dependent-Ginzburg-Landau (TDGL) 展開に対応する展開を行なう。

$$gt^{-1}(\mathbf{q}, \Omega) = t_0 + b\mathbf{q}^2 - (a_1 + ia_2)\Omega. \quad (6)$$

ここで、 $t_0 = 1 + g\chi_0(\mathbf{0}, 0) = 0$ がサウレス条件に対応し、超伝導転移近傍では t_0 は非常に小さくなるので、今後 t_0 をスモールパラメーターとして計算を進める。その意味で、この計算は実際の超伝導転移点近傍からのアプローチになっている。

まず、これらの (TDGL) 展開パラメーターの性質を考えてみよう。これらは弱結合では以下のように表される。

$$\begin{aligned} t_0 &= 1 + g \int d\varepsilon \frac{\tanh(\frac{\varepsilon}{2T})}{2\varepsilon} \rho_d(\varepsilon) \cong |g| \rho_d(0) \frac{T - T_c}{T_c}, \\ b &= |g| \int d\varepsilon \frac{\rho_d(\varepsilon) \bar{v}_F^2}{16\varepsilon} \frac{\partial^2 f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \cong |g| \rho_d(0) \frac{7\zeta(3)}{32(\pi T)^2} \bar{v}_F^2, \\ a_1 &= |g| \int d\varepsilon \frac{\tanh(\frac{\varepsilon}{2T})}{(2\varepsilon)^2} \rho_d(\varepsilon), \\ a_2 &= |g| \rho_d(0) \frac{\pi}{8T}, \end{aligned} \quad (7)$$

ここで、 $\rho_d(\varepsilon)$ は $d_{x^2-y^2}$ -波に対して有効な状態密度であり、 $d_{x^2-y^2}$ -波の形状因子を用いて以下のように表される。

$$\rho_d(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(\varepsilon) \varphi_{\mathbf{k}}^2, \quad (8)$$

ここで、 $\rho_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ は一粒子スペクトルであり、一般の状態密度は $\rho(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ となる。 $d_{x^2-y^2}$ -波の擬ギャップは $\varphi_{\mathbf{k}}$ の大きいところで開くことを考えれば、 $\rho_d(\varepsilon)$ は $\rho(\varepsilon)$ よりも $d_{x^2-y^2}$ -波の擬ギャップ形成に対して敏感な関数であることが分かる。

b は超伝導のコヒーレンス長 ξ の 2 乗に比例するパラメーターで弱結合では非常に大きな値を持つ。このパラメーターが小さくなることは一般に揺らぎの寄与が大きくなることを意味する。

また、 a_1 は粒子-ホール対称性のある系では常に 0 であるが、現実の系では常に非対称性があり、バンド構造によって正負の決まる有限の値を持つ。一般には状態密度のエネルギー微分で表され ($a_1 \propto \frac{\partial \rho_d(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon=0}$)、超伝導揺らぎのホール係数に対する寄与を決定するが [10]、 a_2 と比べて T_c/ε_F に関して高次項となり通常は弱結合からのアプローチでは無視される。

これらが、強結合になった場合、さらに擬ギャップが開いた場合を考えてみると、大まかに言って、 $b \propto \rho_d(0)/T_c^2$, $a_2 \propto \rho_d(0)/T_c$ の関係があることを考えると、 b , a_2 は著しく小さくなる。一方、 a_1 に対しては上記の弱結合の場合の表式は電子格子相互作用による超伝導の場合に正当化される表式で、高温超伝導体のように電子電子相互作用を起源に持つ場合には、それと同程度の寄与が高エネルギーからの寄与として存在する。高温超伝導体の場合には、それは主に $(\pi, 0)$ の Van-Hove 特異点の近傍からの寄与であり、前者と同じ負の符号を持つ。これは強結合、及び、擬ギャップに対してあまり敏感でなく、ある程度の値が残る。そのために、強結合超伝導を考える際には a_1 を無視することはできず、むしろ $a_2 < |a_1|$ となる状況も考えられる。

T-matrix が超伝導揺らぎのプロパゲーターに対応することを考えると、その虚数部分が小さくなるわけで、そのことが意味することは、弱結合においては拡散的なモードであった超伝導揺らぎが「良いモード」になり、ここで、pre-formed pair としての性質を持つということである。

次章でこれらのパラメーターを数値的に直接的に決定する計算を行ない、そこで、これらのパラメーターの振舞いが確認されるが、ここでは現象論的にパラメーターを導入して、解析的に一粒子グリーン関数を計算する。

まず、 $a_2 \ll |a_1|$ の極限をとると、T-matrix の虚数部分は以下のようにデルタ関数で書ける。

$$\text{Im}t(\mathbf{q}, \Omega) = g \frac{\pi}{a_1} \delta(\Omega - \Omega_{\mathbf{q}}) \quad (9)$$

ここで、 $\Omega_{\mathbf{q}} = (t_0 + b\mathbf{q}^2)/a_1$ であり、これが pre-formed pair の分散関係に対応する。注意すべきことは、高温超伝導体の場合、 a_1 は負であり、 $\Omega_{\mathbf{q}} < 0$ である。つまり、高温超伝導体においては pre-formed pair は電子的ではなく、ホールのである。このことからノジエール-シュミットリンクの意味での化学ポテンシャルのシフトは電子ガスモデルとは逆に上向きにシフトすることになる。

ちなみに、アロノフらにより、磁場中の超伝導揺らぎの領域で見られるホール係数の符号の反転が、弱結合の表式と（つまり、 a_1 が負であること）と矛盾するということが指摘されており、長く問題となっている [11]。Geshkenbein らにより、電子的な pre-formed pair の存在を仮定することによりこの問題が解決されるという提案がなされているが [12]、強結合超伝導を考えてもあくまでも pre-formed pair はホールのであり、単純な強結合のシナリオだけではこの問題は解決できないと考えられる。

ここで、 t_0 が小さい時にもっとも発散的な寄与のある項を集める方針で、図 3 (a) の 1 ループのダイアグラムによる自己エネルギーを解析的に計算することができるが、その大まかな振舞いは以下ようになる。

$$\text{Re}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega) = \begin{cases} -g\varphi_{\mathbf{k}}^2 \frac{T}{4\pi b} \frac{1}{\alpha} \log\left[\frac{a_1}{t_0} \min(T, \alpha, \alpha^2 b/|a_1|v_{\mathbf{k}}^2)\right] & (|\alpha| \gg \frac{t_0}{|a_1|}) \\ -g\varphi_{\mathbf{k}}^2 \frac{T}{2\pi a_1 v_{\mathbf{k}}^2} \left(\frac{a_1}{t_0} \alpha - 1\right) & (|\alpha| \sim \frac{t_0}{|a_1|}), \end{cases} \quad (10)$$

$$\text{Im}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega) = \begin{cases} g\varphi_{\mathbf{k}}^2 \frac{T}{4b} (\alpha^2 + \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{b} t_0)^{-\frac{1}{2}} & (|\alpha| \leq T) \\ 0 & (\alpha \geq \frac{|a_1|v_{\mathbf{k}}^2}{4b} - \frac{t_0}{|a_1|}), \end{cases} \quad (11)$$

ここで、 $\alpha = \omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}$ である。この典型的な振舞いを図 4 に示す。

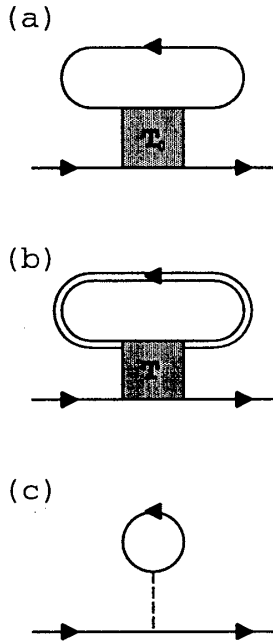


図 3: (a) T-matrix 近似、(b)self-consistent T-matrix 近似に対応するダイアグラム。(c) ハートリーフォック項

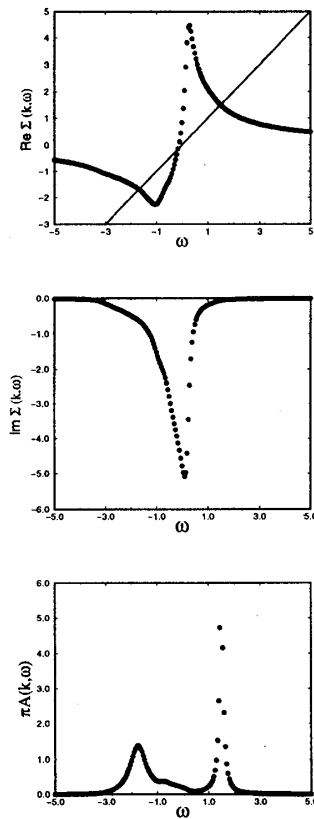


図 4: 上から順に、(a) 自己エネルギーの実数部分、(b) 虚数部分、(c) 一粒子スペクトル

この自己エネルギーの主な特徴は、実数部分が $\omega = 0$ 付近で大きな正の傾きを持ち、虚数部分の絶対値が $\omega = 0$ 付近で鋭いピークを持つことである。これらの振舞いは通常のフェルミ液体論と全く異なるものであり、熱的に揺らいでいる pre-formed pair との resonance の効果である。数式的には、T-matrix の強い運動量依存性、振動数依存性がこのような振舞いを生んでいる。実は、弱結合においても、つまり、 $a_2 \gg |a_1|$ の場合でも同様な振舞いがあるが、この場合には絶対値が著しく小さくなり、強結合の場合のような異常な振舞いには結び付かない。

ここで、一粒子スペクトル $A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(\mathbf{k}, \omega)$ を考えよう。図4 (a) に示されるように $\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \text{Re} \Sigma^R(\mathbf{k}, \omega) = 0$ の解は3つあるが、中央の $\omega = 0$ 付近の解は大きな虚数部分のために潰されて、一粒子スペクトルは残りの2つの解に対応する2-ピークの構造を持つ。(図4 (c)) これは、以下のような位置にピークを持つ、超伝導状態と似たギャップ的な構造である。

$$E = \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}, \quad (12)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^2 = |g| \varphi_{\mathbf{k}}^2 \frac{T}{4\pi b} \log[T/\frac{t_0}{a_1}]. \quad (13)$$

超伝導状態においては、凝縮したクーパペアに対応するギャップが存在するが、今の場合、 $\Delta_{\mathbf{k}}^2 \propto n_B \propto \sum_{\mathbf{q}} b(\Omega_{\mathbf{q}})$ であり、熱的に励起された pre-formed pair の数に対応したギャップを持つ。さらに、今の場合には、pre-formed pair がホールのことを反映して、自己エネルギーおよび一粒子スペクトルに本質的な非対称性があり、一粒子スペクトルの2つのピークのうち低エネルギー側には比較的緩いピークが、高エネルギー側には鋭いピークができる。

このように、強結合超伝導の場合には強い揺らぎにより、超伝導転移点より高温からフェルミ液体が不安定になり、ギャップ的な振舞いが存在することが分かる。ここで用いた TDGL 展開による枠組に基づいて、次章において展開パラメーターを明示的に決定した上での計算結果を示す。

3 数値計算の結果

3.1 T-matrix 近似

まず、超伝導揺らぎを取り込む最低次の近似として、T-matrix 近似に対応する計算を行なう。グリーン関数として、裸のグリーン関数 $G^{R(0)}(\mathbf{k}, \omega) = (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta)^{-1}$ を用いて、T-matrix を計算することで TDGL パラメーターを計算し、図3 (a) のダイアグラムに対応する自己エネルギーを計算する。ただし、図3 (c) に対応する自明なハートリーフォック項は元の分散関係に入っていたものとして除外する。この場合、裸のグリーン関数を用いるため、超伝導転移温度は常に平均場の転移温度 T_{MF} に等しく、そのため、 T_{MF} 以上の温度における計算になる。

一粒子スペクトル及び状態密度の計算結果を図5、図6に示す。

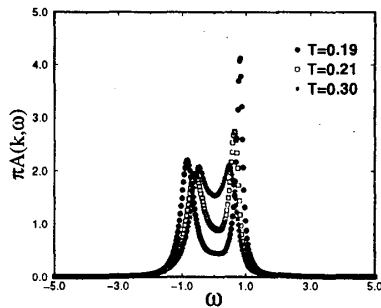


図 5: 一粒子スペクトルの温度変化

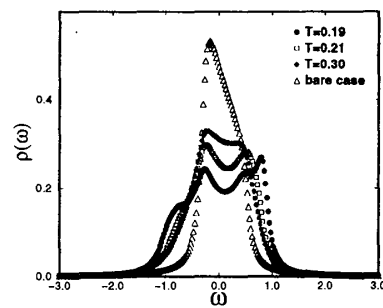


図 6: 状態密度の温度変化

低温になり、超伝導転移温度に近づくにつれて、一粒子スペクトルにギャップ構造がはっきり見

えており、フェルミエネルギーでの状態密度が減少していくのが分かる。ただし、状態密度に対しては、フェルミ面の近傍の運動量のみ和をとっているため、ピークの位置は正確でなく、フェルミエネルギー近傍での減少のみが本質的である。

一粒子スペクトルの運動量依存性を見ると、図7、図8のようになる。

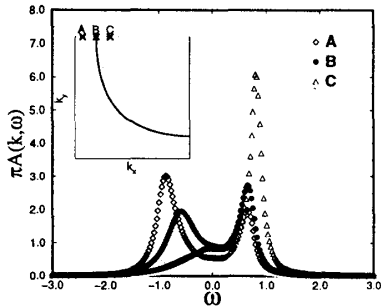


図 7: 自己エネルギーの運動量依存性：フェルミ面を横切るように変化する場合

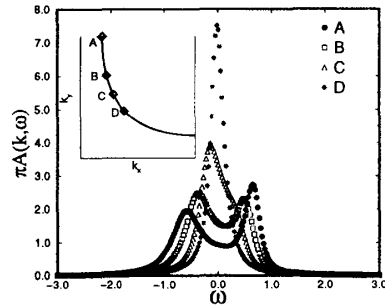


図 8: 自己エネルギーの運動量依存性：フェルミ面に沿って変化する場合

特に、 d -波超伝導の前駆現象であることを反映して、 $(\pi/2, \pi/2)$ 近傍ではフェルミ液体的なピークが見えており、これは角度分解光電子分光の実験とよく対応する [13]。

これらの結果は様々な実験で見られている擬ギャップ現象をよく説明する。しかし、超伝導揺らぎは転移温度 T_c を著しく抑制するはずであり、その抑制された T_c 近傍での、つまり、平均場の転移温度以下での電子状態に興味があるので、そのためには次節のセルフコンシステントな計算が必要になる。

3.2 Self-consistent T-matrix 近似

ここでは、繰り込まれたグリーン関数 $G^R(\mathbf{k}, \omega) = (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma^R(\mathbf{k}, \omega))^{-1}$ に対して、TDGL パラメーター、及び図 3 (b) のダイアグラムに対応する自己エネルギーをセルフコンシステントに決定する。さらに、揺らぎによって押えられた超伝導転移温度を計算し、相図を求める。

ただし、フェルミ面近傍の電子状態に興味があるので、その領域のみで繰り込まれたグリーン関数を用い、運動量、振動数の積分に適当なカットオフを導入する。また、図 3 (c) に対応する自明なハートリーフォック項は元の分散関係に入っていたものとして除外する。これらの近似は少なくとも揺らぎの強い領域では結果に影響しない。

さらに、数値計算の収束性のために、結合定数 g ではなく、パラメーター t_0 を固定して計算する。その結果、 g はセルフコンシステントな解として求まることになる。 t_0 は超伝導転移との近さを表すパラメーターであるため、これが変化すると状況が大きく変わることになり、揺らぎの強い領域では数値計算の収束性が著しく悪くなる。実際、今回得られた揺らぎの強い領域の計算結果はほぼ全て t_0 を固定した計算でなければ、解を得られない。

t_0 を変化した時の一粒子スペクトルと状態密度の計算結果を図 9 と図 10 に示す。

図 9 に示されているように、平均場の転移温度よりも高温においては通常のフェルミ液体的なピークを示していた一粒子スペクトルが、 t_0 が小さくなり超伝導転移点に近づくにつれてしだい

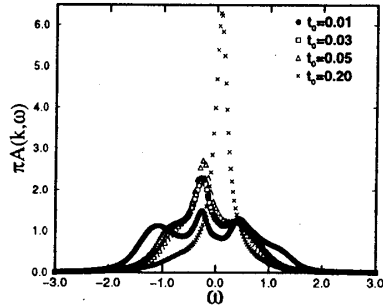


図 9: 一粒子スペクトルの変化

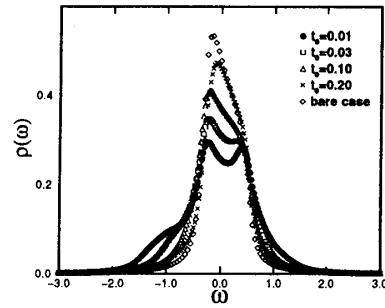


図 10: 状態密度の変化

に非対称性なスペクトルになり、フェルミエネルギー $\omega = 0$ のスペクトルが抑制されていく。実は resonance の考え方をよく考えれば、このような非対称なスペクトルがセルフコンシステントな解としては本質的に重要なことであることがわかる。

例えば、resonance の考え方によると、一粒子スペクトルが $\omega = \omega_p$ に大きなウェイトを持つと自己エネルギーの虚数部分が $\omega = -\omega_p$ で大きな値を持つことになり、そこでのウェイトを抑制する。そのため、少なくとも対称的なスペクトルはセルフコンシステントな解としては非常に不利であることが分かる。また、同様の理由で、フェルミエネルギー $\omega = 0$ でのスペクトルは必ず抑制されることも自然に理解できる。

つまり、もともと系に備わっていた粒子-ホール非対称性がセルフコンシステントな解を安定化させるために重要な役割を果たしており、その結果、常にフェルミエネルギーにおけるスペクトルは抑制される。そのために、フェルミエネルギーでの状態密度も減少していくが、この減少は平均場の転移温度程度から始まる。転移点近傍でのフェルミエネルギーでの状態密度はおもに $(\pi/2, \pi/2)$ 近傍からの寄与によるものであり、第2章で述べたように $\rho_d(0)$ はより激しく抑制されている。また、この時、TDGL パラメーターは第2章で行なった議論の結果を再現している。

典型的な 3-ピーク構造が見える場合の自己エネルギーの振舞いを図 11、12 に示す。自己エネルギーは非常に複雑な形をしているが、ここでも、resonance の考え方をよく考えれば、このような形がセルフコンシステントな解として安定であることが分かる。

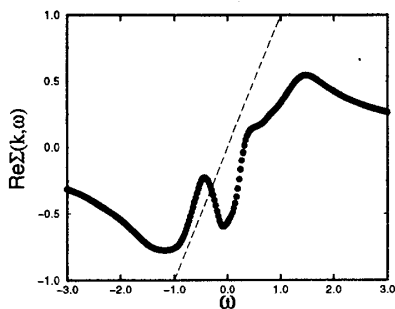


図 11: 自己エネルギーの実数部分

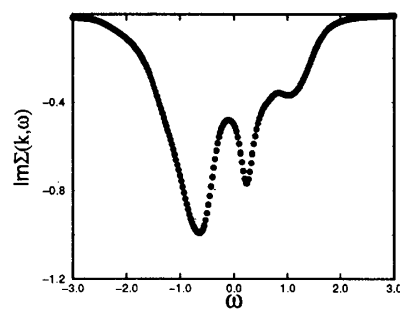


図 12: 自己エネルギーの虚数部分

この自己エネルギーはノーマンらが角度分解光電子分光の実験を解析するために仮定した自己

エネルギーとは異なる振舞いをしている [14]。ノーマンらの仮定は、粒子-ホール対称性を仮定して解析したスペクトルに基づいており、そのような仮定は上に述べたようにセルフコンシステントな解としては非常に不安定である。それ故に、図 1 1、1 2 に示されたような自己エネルギーが安定な解として必要であり、彼らの仮定はこの結果と矛盾することになる。

実際にこの 3-ピーク構造とコンシステントな角度分解光電子分光の実験結果も得られている [15]、このような複雑な構造が現れる場合は、全体的にスペクトルが非常にブロードになっており、さらに実験の分解能に対応して小さな領域で運動量について和をとると、このような複雑な構造は見えなくなってしまうために、実験で見えなくても矛盾はないと思われる。

図 1 3、1 4 に典型的な 3-ピーク構造を取る場合の一粒子スペクトルの運動量依存性を示す。

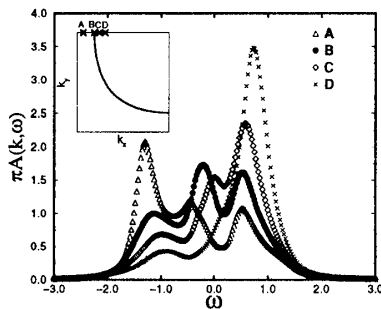


図 13: 自己エネルギーの運動量依存性：フェルミ面を横切るように変化する場合

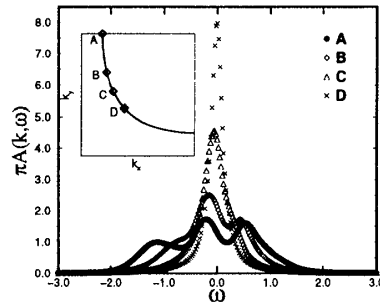


図 14: 自己エネルギーの運動量依存性：フェルミ面に沿って変化する場合

図 1 3 より、これらの 3 つのピークは k_x と共にそれぞれ高エネルギー側にシフトしていくことが分かる。特に中央のピークはフェルミ面からわずかにはなれた運動量 (C) で、フェルミエネルギーの位置にピークを作るが、これは揺らぎが強くなるにつれて抑制され、最終的に (D) では消えてギャップ的な 2-ピーク構造になる。

また、図 1 4 より、 $(\pi/2, \pi/2)$ 近傍ではフェルミ液体的なピークが見えており、これが、 $(\pi, 0)$ に近づくにつれてギャップ的な振舞いに変わっていくことが分かる。このように、 d -波超伝導の前駆現象としてとらえることにより、角度分解光電子分光で見えているように、擬ギャップが超伝導のギャップとよく似た形状を持つことが自然に理解できる [13]。

最後に図 1 5 に超伝導転移温度及び相図を示す。ただし、厳密な 2 次元系ではマーミン-ワグナーの定理としてよく知られているように有限温度の超伝導転移は存在せず、常に $T_c = 0$ となる。今回の計算もそのような 2 次元的な強い揺らぎを採り入れた結果、自己エネルギーに対数発散があり、そのために厳密には超伝導転移温度は 0 になる。しかし、現実の層状化合物である高温超伝導体においては弱い 3 次元性が必ずこのような発散を取り除くので、低次元系特有の大きな揺らぎの寄与はあっても、2 次元系の特異性としての発散は非物理的である [16]。ここでは、そのような事実を現象論的に採り入れて $t_0 = 0.01$ となったところで、超伝導転移点を決定する。もちろん、相図の定性的な様子はこのような定義の詳細によらない。

強結合になるにつれて、超伝導転移温度 T_c が揺らぎにより著しく下げられていることが分かる。これは主に、熱的な超伝導揺らぎによる散乱により、状態密度が下げられたことによるもの

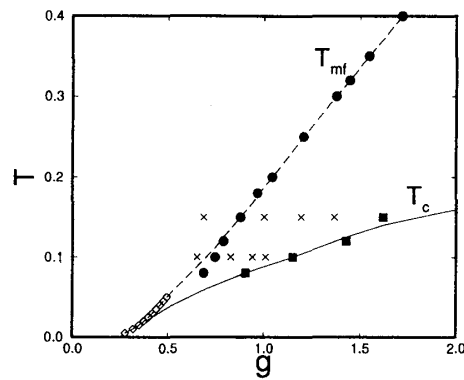


図 15: 今回得られた相図。黒丸が平均場の超伝導転移温度 T_{MF} 、黒四角がセルフコンシステントに決定した転移温度 T_c 、また、 \times はこの章で一粒子スペクトル及び状態密度を示した点にそれぞれ対応する。

で、ノジエール-シュミットリンクで扱われているような化学ポテンシャルのシフトによるものとは異なる効果である。

この状態密度の減少は T_{MF} 程度の温度から始まり、様々な物理量に変化をもたらす。これが擬ギャップ現象であり、言い換えると、 T_{MF} と T_c の間が擬ギャップ領域である。このように、擬ギャップ現象の始まる温度が平均場の転移温度とよく一致することは実験ともよく一致する [17]。

このようなセルフコンシステントな計算を行なうことにより、実験で観測されているようないくつかの特徴を含めて、擬ギャップ現象を強結合超伝導の前駆現象としての強い超伝導揺らぎによって起こる現象として自然に理解できる。

4 まとめと議論

本研究においては、現実的な要素を採り入れた超伝導の強結合理論に基づいて、超伝導転移点より高温で一粒子スペクトル及び状態密度にギャップ的な振舞いがあること、転移温度が揺らぎにより著しく下げられることなどを導き、高温超伝導体の擬ギャップ現象が超伝導の前駆現象として自然に理解できることを示した。

最後にまとめを兼ねて、いくつかのことに対して議論をする。

4.1 擬ギャップ現象に対して重要な要素

はじめに述べたように、今回の計算で重要であった点が幾つかあるので、簡単に整理してみよう。

まず、強結合超伝導であることは、最も本質的に重要である。結合定数 g は直接的にはあまり出てこないが、TDGL 展開パラメーターに本質的にその情報が含まれており、強い揺らぎ、特に良いモードとしての揺らぎの性質が擬ギャップ現象の起源であった。また、これらは主に熱揺らぎによる現象であり、そのためにも超伝導転移温度が高いことが本質的である。

そして、格子上ハーフフィールド近傍であることは、高密度と見なせるために重要である。第2章で示したように、今回の枠組の中では、熱的に励起された pre-formed pair の数 n_B に対応してギャップ構造が現れる。低密度極限では、大雑把に言えば、ボソンの数 n_B が大きくなると、粒子数保存のために電子の数（高温超伝導体の場合にはホールの数）が減るために化学ポテンシャルがシフトする。それがノジエールとシュミットリンクの枠組が低密度極限で正当化される理由でもある。そのような場合、 n_B が大きくなって今回のような効果が現れる前にボソン系と見なすべき状況になってしまい、結局、今回のような形での擬ギャップ現象は起こらない。

そして、粒子-ホール非対称性があることが、セルフコンシステントな解を安定化するのに重要である。そのため、粒子-ホール対称的な系においては擬ギャップ現象は起こりにくい。ただし、この場合、常に $a_1 = 0$ であり、超伝導揺らぎは拡散的であるが、このような場合にも強い揺らぎは必ずフェルミ液体を不安定にするので、(数式の上では、T-matrix の $q = \Omega = 0$ 近傍が大きな寄与を持つという意味では同じである) 擬ギャップ現象が起こることは難しいだけで、不可能ではない。ただし、正方格子の場合には粒子-ホール対称的なモデルにはパーフェクトネスティングが存在し、あまり現実的ではない。むしろ、粒子-ホール対称性はない方が一般的な場合であり、特に、高温超伝導体は Van-Hove 特異点が存在するために、比較的、非対称性の強い系であると言える。

また、強い2次元性が低次元系に特有の強い揺らぎを起こしており、それが、自己エネルギーの対数発散を導く。最終的に弱い3次元性によりこの発散は取り除かれるが、自己エネルギーに大きな寄与をするという意味ではこの強い2次元性は重要な役割を担っている。

これらのことは、それぞれ高温超伝導体の現実的な状況を反映しており、今回行なったような現実的な取り扱いが重要であることが分かる。言い換えると、擬ギャップ現象は高温超伝導体の個性をよく反映した現象であるとも言える。

4.2 相図の連続性

高温超伝導体の擬ギャップ現象を考える上で、超伝導状態へと連続的につながることの重要性はこれまでも強調してきた。この点で反強磁性的なギャップからのアプローチは困難であると思われる。

そして、もう一つ、オーバードープからアンダードープまで連続的につながることも全体の相図を考える上で重要である。(この点で、RVB 理論によるアプローチは常に困難に直面する。)

よく知られているように、高温超伝導体の擬ギャップ現象は最適ドープからアンダードープにかけて起こる現象である。一方、オーバードープ領域においては通常のBCS的な超伝導転移が起きているといわれている。本研究の理論的な枠組は弱結合領域から強結合領域まで連続的に取り扱うことができ、その観点からこの連続性を自然に理解できる。特に、弱結合領域においては強結合領域のような劇的なことは起こらないが、同様に T-matrix の運動量及び振動数依存性により、超伝導転移点近傍で自己エネルギーの虚数部分が大きくなることなどの変化が絶対値は小さいながら起こり、状態密度が多少減少することが分かる。

この領域に関しては通常の弱結合からのアプローチが既に幾つかあり、DOS 補正項という形で計算が行なわれている [16, 18, 19]。弱結合からのアプローチなのでアンダードープ領域の擬ギャッ

ブまでは説明できないが、最適ドーピング領域においては擬ギャップ現象をうまく説明できると思われる。特に、エスリッヒらにより、最適ドーピング領域での NMR のスピン格子緩和率 $1/T_1$ の超伝導転移点近傍の減少が磁場変化を含めて弱結合からのアプローチで説明できることが示されている [19]。彼らの計算の中でもこの DOS 補正項の重要性が示されている。一方、我々が今回行なった計算はそのような弱結合からのアプローチの自然な拡張にもなっており、特に、アンダードーピング領域に入ると今回のような取り扱いが必要になると思われる。

そのような意味では、また、ノジエールとシュミットリンクが扱ったような強結合極限とは異なった状況を考えているという意味では、今回の計算は強結合というより中間結合と呼ぶべきかも知れない。

全体的には、オーバードーピング領域から最適ドーピング領域に近づくにつれて、転移温度 T_c が上がり、電子相関による繰り込みでフェルミエネルギー ε_F が有効的に小さくなる。そのために T_c/ε_F が大きくなり、超伝導揺らぎの効果が効いてくる。さらに、アンダードーピング領域になると、強結合としての取り扱いが必要になり、揺らぎにより転移温度が著しく押えられ、広い領域で擬ギャップ現象が起こる。

このように、高温超伝導体の擬ギャップ現象は、相図の連続性を含めて、超伝導の前駆現象という立場で自然な理解が可能である。今回の研究は、アンダードーピングからオーバードーピングまでを連続的に理解する上で、自然なアプローチになっている。

4.3 今後の課題

本稿においては主に電子状態に注目して計算を行なったが、擬ギャップ現象は相転移ではなくクロスオーバーであるので、それが物理量に与える影響の見え方はそれぞれの物理量によって異なることも自然な結果である。また、強結合超伝導の領域では擬ギャップ現象は比較的コヒーレンシーの発達していない状況で起こり始めるので、磁場から受ける影響が小さいことなど、弱結合とはかなり異なった振舞いが見られると考えられる。このように物理量を具体的に計算することは今後の重要な課題である。

また、既に述べたように、強結合超伝導が起こる際の舞台として、強い電子相関によりフェルミエネルギー ε_F が繰り込まれて有効的に小さくなっていることが重要である。そういう意味で、強結合超伝導は強相関電子系の超伝導の一般的な特徴の一つと考えられる。実際に、繰り込まれた準粒子による超伝導として一般的な定式化をすることが重要な課題であると思われる。

参考文献

- [1] For example, W. W. Warren, R. E. Walstedt, G. F. Brennert, R. J. Cava, R. Tycko, R. F. Bell and G. Dabbagh: Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 1193.
- [2] T. Tanamoto, H. Kohno and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn **63** (1994) 2739.
- [3] A. V. Chubukov, D. K. Morr and K. A. Shakhnovich: Philos. Mag. B **74** (1996) 563.; D. Pines: Z. Phys. B **103** (1997) 129.

- [4] H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano, T. Takahashi, M. Randeria, M. R. Norman, T. Mochiku, K. Kadowaki and J. Giapintzakis: *Nature*. **382** (1996) 51.; A. G. Loeser, Z. X. Shen, D. S. Dessau, D. S. Marshall, C. H. Park, P. Fournier and A. Kapitulnik: *Science*. **273** 325.
- [5] Ch. Renner, B. Revaz, J.-Y. Genoud, K. Kadowaki and Ø. Fischer: *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 149.
- [6] M. Randeria: preprint. (cond-mat/9710223); C. A. R. Sá de Melo, M. Randeria and J. R. Engelbrecht: *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 3202.
- [7] P. Nozières and S. Schmitt-Rink: *J. Low Temp. Phys.* **59** (1985) 195.
- [8] J. R. Engelbrecht, A. Nazarenko, M. Randeria and E. Dagotto: *Phys. Rev. B* **57** (1998) 13406. ; T. Ichinomiya and K. Yamada: *J. Phys. Soc. Jpn.* **68** (1999) 981. ; J. Maly, B. Jankó and K. Levin: preprint. (cond-mat/9805018)
- [9] Y. Yanase and K. Yamada: *J. Phys. Soc. Jpn* **68** (1999) 548.
- [10] H. Ebisawa and H. Fukuyama: *Prog. Theor. Phys* **46** (1971) 1042.
- [11] A. G. Aronov and A. B. Rapoport: *Mod. Phys. Lett. B* **6** (1992) 1083.
- [12] V. B. Geshkenbein, L. B. Ioffe and A. I. Larkin: *Phys. Rev. B* **55** (1997) 3173.
- [13] M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria, J. C. Campuzano, T. Yokoya, T. Takeuchi, T. Takahashi, T. Mochiku, K. Kadowaki, P. Guptasarina and D. G. Hinks: *Nature*. **392** (1998) 157.
- [14] M. R. Norman, M. Randeria, H. Ding and J. C. Campuzano: *Phys. Rev. B* **57** (1998) 11093.
- [15] T. Takahashi: private communication.
- [16] M. Randeria and A. A. Varlamov: *Phys. Rev. B* **50** (1994) 10401.
- [17] M. Oda, K. Hoya, R. Kubota, C. Manabe, N. Momono, T. Nakano and M. Ido: *Physica. C* **281** (1997) 135.
- [18] C. Di Castro, R. Raimondi, C. Castellani and A. A. Varlamov: *Phys. Rev. B* **42** (1990) 10221.
- [19] M. Eschrig, D. Rainer and J. A. Sauls: preprint. (cond-mat/9901233)